سومین کنفرانس تخصصی سه شنبه و چهارشنبه ۲۹ و ۳۰ اردیبهشت ماه ۱۳۹۴
فناوری نانو در صنعت برق و انرژی

No. 15-F-AAA-0000

معادلات BdG برای نانوسیم‌های ابررسانا و روش حل اندرسون

میثم غائبی
گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه
دانشگاه محقق اردبیلی
اردبیل، ایران
meysam_ghaebi@yahoo.com

رامین روزه‌دار مقدم
گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه
دانشگاه فردوسی مشهد
مشهد، ایران
ramin.roozehdarmogaddam@stu.um.ac.ir

الهام فرشید
گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه
دانشگاه محقق اردبیلی
اردبیل، ایران
elham_farshid@yahoo.com

چکیده — در این مقاله معادله‌های BdG برای سیم‌های ابررسانا در مقیاس نانو با تقریب اندرسون مورد بررسی قرار گرفته است. وضعیت سیستم، وابسته به گاف انرژی مربوط به زیرنوار یا "پارامتر نظم ابررسانا" می‌باشد. این پارامتر برای نانوسیم‌های ابررسانای استوانه‌ای بدست آمده است. غیر صفر بودن این پارامتر بدان معنی است که سیستم نوعی نظم پیدا کرده است و خاصیت ابررسانایی خود را برای ضخامت-های بسیار کم حفظ می‌کند.

واژه‌های کلیدی — نانوسیم؛ ابررسانا؛ معادلات BdG؛ روش حل اندرسون.

۱. مقدمه

پیشرفت‌های اخیر در تکنولوژی ساخت نانوساختارها منجر به تولید ساختارهای فلزی با کیفیت بالا در مقیاس نانو شده است. برای مثال می‌توان فیلم‌های تک بلور با ضخامت‌های تا حد چند تک لایه (تک لایه به فیلمی گفته می‌شود که ضخامت آن به اندازه یک مولکول است) و سیم‌های (هم تک بلور و هم تشکیل شده از ریزدانه‌های به شدت جفت شده) با پهنای تا حد ۵ الی ۱۰ نانومتر را نام برد [۱].

در اغلب نمونه‌های ساخته شده، مسیر آزاد میانگین L در مقیاس ضخامت نانوفیلم یا نانوسیم (d) بود. در [۲]، تخمین $\frac{1}{L}=\frac{1}{d}+\frac{1}{L_{imp}}$ توسط Ozer و همکاران مورد استفاده قرار گرفت که برای یک تک بلور سرب از لحاظ اتمی یکنواخت و دارای ضخامت سی تا چهل آنگستروم و مساحت ۴۰۰ nm در ۴۰۰ nm، L_{imp} حدود ۲۰۰ تا ۴۰۰ نانومتر بدست آمد. در نانوسیم‌های با کیفیت بالا، بی‌نظمی قابل توجه‌تر است و تکنولوژی-های امروزی، امکان ساخت نانوساختارهایی با بی نظمی کمتر (L_{imp} ? d) را فراهم می‌کند. با اینکه نوسان‌های کوانتمی، ابررسانایی را در نانوسیم‌های با ضخامت کمتر از ده نانومتر از بین می‌برد، اما در نانوسیم‌های فلزی با کیفیت بالا، اثرهای واضحی از ابررسانایی، حتی برای

ضخامت‌های کمتر از پنج نانومتر مشاهده می‌شود یعنی در این مورد طیف عرضی گسسته الکترون با ناخالصی پراکنده شده آغشته نمی‌شود.

کوانتیزه بودن حرکت عرضی الکترون در نوار رسانش نانوسیم‌ها باعث می‌شود مجموعه‌ای از زیرنوارها شکسته شود و ابررسانایی به وسیله مجموعه‌ای از کانال‌های کوانتمی پشتیبانی شود. چنین زیرنوارهای تک الکترونی، هنگام تغییر ضخامت نانوسیم تغییراتی بر حسب انرژی دارند. اگر یک زیرنوار از سطح فرمی عبور کند، یک افزایش سریع در چگالی حالت‌های تک الکترونی در سطح فرمی و به نوبه خود یک افزایش در پارامتر نظم ابررسانایی خواهیم داشت. همین طور پایستگی انتقالی شکسته می‌شود و پارامتر نظم ابررسانایی وابسته به مکان می‌شود [۳]. در [۴]، در نظریه تقریب میدان میانگین، $\hat{\Delta}$، پارامتر نظم ابررسانا به صورت

$$\Delta(r) = g \sum_n u_n(r) v_n^*(r) (1 - 2f_n) \qquad (۱)$$

تعریف می‌شود که f_n تابع فرمی ($f_n = \frac{1}{e^{\beta E_n} + 1}$) می‌باشد.

۲. فرمول‌بندی BdG برای نانوسیم‌های ابررسانا

معادلات Bogoliubov-deGennes معروف به معادلات BdG یک چارچوب نظری قوی برای یک بررسی میکروسکوپی از یک وضعیت با پارامتر نظم ابررسانایی وابسته به مکان است. این معادلات را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$E_n u_n(r) = \hat{H}_e u_n(r) + \Delta(r) v_n(r) \qquad (۲)$$

$$E_n v_n(r) = -\Delta^*(r) u_n(r) - \hat{H}_e^* v_n(r) \qquad (۳)$$

که $|u_u\rangle$ و $|v_u\rangle$ بردارهای کت شبه ذره و شبه حفره و E_u انرژی شبه ذره است. $\hat{H}_e$ و $\hat{H}_e^*$ به ترتیب هامیلتونی و مزدوج مختلط هامیلتونی یک تک الکترون است. در حد خالص، $\hat{H}_e$ (اندازه‌گیری شده از تراز فرمی E_F) به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\hat{H}_e = \frac{(\hat{p} + m_e \hat{v}_s)^2}{2m_e} + V_{conf}(\hat{r}) - E_F \qquad (۴)$$

که m_e جرم نوار (الکترون آزاد) و $V_{conf}(\hat{r})$ پتانسیل محدود کننده است که فرض می‌کنیم در داخل نمونه ابررسانا صفر و در بیرون بی‌نهایت است. $\hat{p}$ عملگر تکانه و $\hat{v}_s$ سرعت ابرشاره است که تابعی از فاز پارامتر نظم می‌باشد. در صورتی که سرعت ابر شاره را صفر در نظر بگیریم، تقارن برگشت زمان اعتبار خواهد داشت [۵و۶].

۳. روش اندرسون برای حل معادلات BdG

معادلات BdG برای ابررساناهای در مقیاس نانو نمی‌تواند به طور تحلیلی حل شود. راه حل ابررسانایی اندرسون بر پایه ویژه توابع $\hat{H}_e$ معرفی شده و از سرعت ابرشاره صرف نظر می‌شود. در تقریب اندرسون در یک زیرفضا با تقارن برگشت زمان، به دنبال کمینه پتانسیل ترمودینامیکی مناسب می‌گردیم. در این زیرفضا، بردارهای کت شبه حفره $|u_u\rangle$ و شبه ذره $|v_u\rangle$ با $|u\rangle$ متناسب است، بطوری که به صورت زیر تقریب زده می‌شود:

$$|u_n\rangle \approx U_n |n\rangle \; ; \; |v_n\rangle \approx V_n |n\rangle \qquad (۵)$$

با شرط $U_u^2 + V_u^2 = 1$ و $|u\rangle$ عبارت است از:

$$\hat{H}_e |n\rangle \approx x_n |n\rangle \qquad (۶)$$

که x_n انرژی تک الکترون مرتبط با $\hat{H}_e$ می‌باشد.

با قرار دادن (۵) در (۲) و (۳)، می‌توان معادلات BdG را از نو به شکل زیر قالب بندی کرد:

$$E_V U_V |v\rangle \approx x_V U_V |v\rangle + \Delta_V |v\rangle \qquad (۷)$$

$$E_n V_n |n\rangle \approx -\Delta_n^* |n\rangle - x_n V_n |n\rangle \qquad (۸)$$

با ضرب این معادلات از چپ در $\langle u|$ با $\Delta_u = \langle u|\hat{\Delta}|u\rangle = \langle u|\hat{\Delta}^*|u\rangle$ می‌توان نوشت :

$$E_n U_n = x_n U_n + V_n \Delta_n \qquad (۹)$$

$$E_n V_n = U_n \Delta_n - x_n V_n \qquad (۱۰)$$

که نتیجه حل (۹) و (۱۰)، $E_u = \pm\sqrt{x_n^2 + \Delta_n^2}$ می‌باشد. از (۹) و (۱۰) همراه با شرط $U_n^2 + V_n^2 = 1$ می‌توان نوشت:

$$V_n^2 = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{x_n}{\sqrt{x_n^2 + \Delta_n^2}}\right) \qquad (۱۱)$$

$$U_n V_n = \frac{\Delta_n}{2\sqrt{x_n^2 + \Delta_n^2}} \qquad (۱۲)$$

در ادامه با استفاده از (۵) و (۱۲)، (۱) بدین صورت در می‌آید:

$$\Delta_n = -\sum_{n'} V_{nn'} \frac{\Delta_{n'}}{2E_{n'}} \tanh\left(\frac{\beta E_{n'}}{2}\right) \qquad (۱۳)$$

که $V_{nn'} = -g \int d^3r \, |\varphi_n(r)|^2 |\varphi_{n'}(r)|^2$ می‌باشد. برای سادگی فرض کنیم که مجموعه‌ای از اعداد کوانتمی عرضی i را به شکلی معرفی می‌کنیم که داشته باشیم $n = \{i, k\}$ که k نشان دهنده اجزای بردار موج کنترل کننده حرکت شبه آزاد الکترون‌های موازی با نانوسیم است. از این رو به علت کوانتیزاسیون عرضی، نوار رسانش به مجموعه‌هایی از زیرنوارهای تک الکترونی کنترل شونده با مجموعه i تقسیم می‌شود. برای نانوسیم‌ها راستای z طولی است یعنی $k = k_z$. برای یک نانوسیم استوانه‌ای کوانتیزاسیون عرضی ایجاب می‌کند که:

$$\varphi_n(r) = \varphi_{jm}(r) \frac{e^{im\theta}}{\sqrt{2\pi}} \frac{e^{ikz}}{\sqrt{L}} \qquad (۱۴)$$

که در آن $(j = 0, 1, 2, \ldots \text{and} \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots)$ و

$u_{jm}(r) = \frac{\sqrt{2}}{R J_{m+1}(\alpha_{jm})} J_m\left(\alpha_{jm} \frac{r}{R}\right)$ می‌باشد.

و طیف تک الکترون متناظر بصورت زیر است:

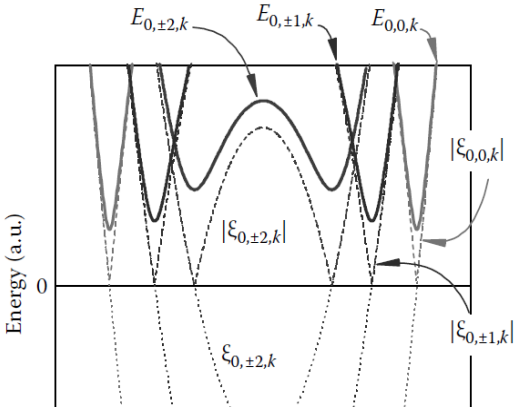
$$\xi_n = \frac{\hbar^2}{2m_e}\left(\frac{\alpha_{jm}^2}{R^2} + k^2\right) - E_F \qquad (۱۵)$$

که $n = \{j, m, k\}$ و J_m تابع بسل نوع اول از مرتبه m و α_{jm}، jامین صفر این تابع است [۷].

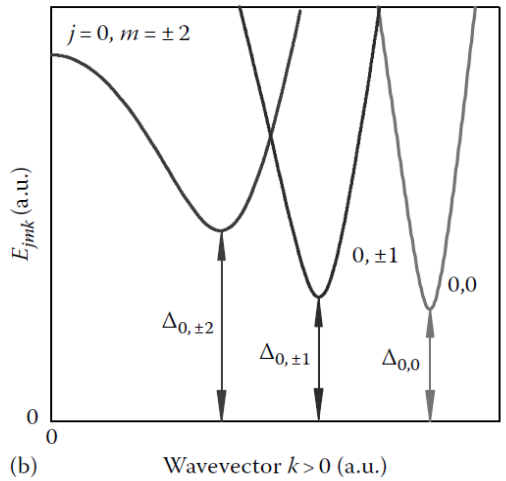
با استفاده از (۱۴) و $\Delta_u = \langle u|\hat{\Delta}|u\rangle = \langle u|\hat{\Delta}^*|u\rangle$ می‌توان به بررسی رفتار نانوسیم استوانه‌ای پرداخت که این نتایج در (۱۶) و (۱۷) همراه با شکل‌های ۱ و ۲ آورده شده است.

$$\Delta_n = \Delta_{jm} = \int_0^R dr r v_{jm}^2(r) \Delta(r) \qquad (۱۶)$$

$$E_n = \sqrt{\xi_{jmk}^2 + \Delta_{jm}^2} \qquad (۱۷)$$



شکل۱: انرژی تک الکترون x_{jmk}، مقدار مطلق آن $|x_{jmk}|$ و انرژی شبه ذره $E_{jmk} = \sqrt{x_{jmk}^2 + \Delta_{jm}^2}$ نسبت به بردار موج برای حرکت موازی با نانواستوانه برای $(0,0), (0,1), (0,2)$ $|m|$ = و j رسم شده است.



شکل۲: انرژی شبه ذره برای زیرنوارهای تک الکترون یکسان نسبت به k

۴. نتایج

در این مقاله معادلات BdG که یک بررسی میکروسکوپی از یک وضعیت با پارامتر نظم ابررسانایی وابسته به مکان بوده و در اغلب گذارهای فازی به راحتی قابل تشخیص است، با استفاده از تقریب اندرسون مورد مطالعه قرار گرفته است. پارامتر نظم در واقع گاف انرژی وابسته به زیرنوار یا متوسط یک کمیت افت و خیز کننده است که امکان دارد در یک فاز، مقدار متوسط آن غیر صفر شود. این بدان معنی است که سیستم نوعی نظم پیدا کرده است و در این حالت می‌توان نانوسیم‌هایی با کیفیت بالا را تولید کرد. بنابراین روش اندرسون راهی برای یک تشکیل یک راه حل تقریبی معقول برای معادلات BdG می‌باشد.

منابع

[1] K.D. Sattler, Handbook of Nanophysics: Principles and Methods. 1th ed., New York: CRC Press, 2010.

[2] M.M. Ozer and J.R. Thompson and H.H. Weitering, "Robust superconductivity in quantum confined Pb: Equilibrium and irreversible superconductive properties," Physical Review B, vol. 74, pp. 1-11, December 2006.

[3] F. Altomare and A.M. Chang and M.R. Melloch and Y. Hong and C.W. Tu, "Evidence For Macroscopic quantum tunneling of phase slips in long one-dimensional superconducting Al wires," Physical Review Letters, vol. 97, pp. 1-4, July 2006.

[4] X.Y. Bao and Y.F. Zhang and Y. Wang, "Quantum size effects on the perpendicular upper critical field in ultrathin lead films," Physical Review Letters, vol. 95, pp. 1-4, December 2005.

[5] N.N. Bogoliubov, "On a new method in the theory of superconductivity," Nuovo Cim, vol. **7**, pp. 794-805, November 1958.

[6] P.G. de genes. Superconductivity of Metals and Alloys. California: Perseus Books, 1999.

[7] [7] P.W. Anderson, "Theory of dirty super nconductors," Journal of Physics and Chemistry of Solids, vol. 11, pp. 26-30, September 1959.